



CENTRO DE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL DO SEMIÁRIDO – CDSA

Marília Luciana Remígio Bezerra¹, Farias Rafael Trindade Maia², Franklin Ferreira de Nóbrega³.

SIMULAÇÕES DE DOCKING MOLECULAR ENTRE ORGANOSSULFURADOS NATURAIS E A PROTEÍNA DE REPLICAÇÃO VIRAL (NSP-9) DO SARS-CoV-2 EM BUSCA DE INIBIDORES PARA REPOSIÇÃO DE FÁRMACOS

RESUMO

O potencial virucida do SARS-CoV-2 vem fazendo inúmeros cientistas estudarem meios eficientes de imunização para população e complementar outros métodos existentes. Após a elucidação da estrutura em 3D da proteína NSP9 de replicação do vírus é possível estudar possíveis inibidores capazes de ligar-se em um sítio catalítico fazendo a inibição parcial ou total da multiplicação viral. Os organossulfurados são conhecidos por sua atividade antiviral e possuir ampla disponibilidade em alimentos tornando-se uma opção viável no uso de reposição de fármacos visando se trabalhar com métodos similaridades, afim de que os compostos atuem como ligantes. A docagem foi utilizada na pesquisa para analisar as interações entre organossulfurado e a proteína NSP9 visando encontrar um composto que possa atuar como possível inibidor da replicação viral, foi possível notar que os compostos sulfurados Ethylthiophene possui uma constante $k=877,13 \mu\text{M}$ em seu complexo 1, já o 3,3,5,5-Tetramethyl-1,2,4-trithiolane possui em seus complexos 1 e 2 respectivamente $237,43 \mu\text{M}$ e $454,33 \mu\text{M}$ e o Sulfanilamide em seus complexos 1, 2 e 3 com $k= 35,46 \mu\text{M}$; $50,89 \mu\text{M}$ e $101,35 \mu\text{M}$, onde essas constantes indicam que a replicação do vírus está sendo inibida devido as interações dos aminoácidos presentes na proteína com os ligantes. Os compostos 2-Ethylthiophene, 3,3,5,5-Tetramethyl-1,2,4-trithiolane e Sulfanilamide, apresentaram números significativos em relação a energia de ligação, necessitando menos quantidade de energia para que as ligações possam ser efetuadas nos complexos.

Palavras-chave: organossulfurado, NSP9, SARS-CoV-2, inibição viral

¹Aluna de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, Departamento UAEB, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: marilialoves2@gmail.com

²Doutor, Orientador, UAEB, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: rafael.rafatrin@gmail.com

³Doutor, Coorientador, UAEDUC, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: franklinnobrega@yahoo.com.br

MOLECULAR DOCKING SIMULATIONS BETWEEN NATURAL SULFUR ORGANOSULFIDES AND SARS-CoV-2 VIRAL REPLICATION PROTEIN (NSP-9) IN SEARCH OF INHIBITORS FOR REPLACEMENT DRUGS

ABSTRACT

The virucidal potential of SARS-CoV-2 has led many scientists to study effective means of immunization for the population and complement other existing methods. After elucidation of the 3D structure of the virus replication protein NSP9 it is possible to study possible inhibitors capable of binding at a catalytic site making partial or total inhibition of viral multiplication. For example, organosulfides that are known for their antiviral activity and have wide availability in food, becoming a viable option in the use of drug replacement in order to work with similar methods, so that the compounds act as ligands. The docking was used in the research to analyze the interactions between the organosulfide and the protein in NSP9 to find a compound that can act as a potential inhibitor of viral replication, it has been possible to note that the compounds of sulfur Ethylthiophene has a constant $k=877,13 \mu\text{M}$ in complex 1, the 3,3,5,5-Tetramethyl-1,2,4-trithiolane has its complexes 1 and 2, respectively, $237,43 \mu\text{M}$, and $454,33$, and the Sulfanilamide in its complex with 1, 2, and 3, with $k= 35,46 \text{ m}$; $50.89 \mu\text{M}$ and $101.35 \mu\text{M}$, where these constants indicate that the replication of the virus is being inhibited due to the interactions of the amino acids present in the protein with the ligands. The compounds 2-Ethylthiophene, 3,3,5,5-Tetramethyl-1,2,4-trithiolane and Sulfanilamide showed significant numbers in relation to the binding energy, requiring less amount of energy for the bonds to be made in the complexes.

Keywords: organosulfides, NSP9, SARS-CoV-2, viral inhibition